TITLE:
摂動計算とLEVEL BROADENING

AUTHOR(S):
川瀬, 茂樹

CITATION:
川瀬, 茂樹. 摂動計算とLEVEL BROADENING. 物性研究 1971, 17(3): 244-251

ISSUE DATE:
1971-12-20

URL:
http://hdl.handle.net/2433/88385

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

摂動計算と LEVEL BROADENING

電　総　研　　川　瀬　茂　樹

（ 11月 20日受理 ）

前回の本誌におきまして，従来看過されてきました摂動計算に本来含まれるべき項（ FORLORN TERM）の重要な役割と，この項の包摂によって明確になりました，摂動論の構造について述べました。それに付随して，中間状態のレベル幅をエネルギー分母に挿入することの淵源を明らかにするのが本稿の目的です。以下 4 次摂動の場合を説明します。

§ 1　時間を含む摂動論

系のハミルトニアンHを次のようにとり，

$$H = H_0 - \lambda H' \tag{1}$$

無摂動ハミルトニアンH_0 の固有値，固有函数を $\{E_n\}$, $\{\varphi_n\}$ とする。初状態 i から終状態 f への単位時間あたりの遷移確率の 4次のもの $w^{(4)}$ は，従来の摂動論では次のようである。

$$w^{(4)} = w_a + w_b + w_b^*$$

$$w_a = \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^4 H'_{in} H'_{nf} H'_{fm} H'_{mi} \frac{\delta(E_{fi})}{E_{ni} E_{mi}}$$

$$w_b = \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^4 H'_{if} H'_{fn} H'_{nm} H'_{mi} \frac{\delta(E_{fi})}{E_{ni} E_{mi}} \tag{2}$$

$$H'_{nm} = (\varphi_n H' \varphi_m), E_{ni} = E_n - E_i$$

私の提案する摂動論は，確率振幅 $a_f(t)$を直接利用する。

$$w_a = \frac{1}{t} |a_f^{(2)}(t)|^2$$

$$w_b = \frac{1}{t} a_f^{(3)}(t) a_f^{*(1)}(t)$$

$$a_f^{(s)} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^s \sum_{m_1, m_2, \cdots m_{s-1}} H'_{fm_1} H'_{m_1 m_2} \cdots H'_{m_{s-1} i} \times \int_c \frac{e^{pt}\, dp}{p(p - i\omega_{fm_1}) \cdots (p - i\omega_{fi})} \qquad (3)$$

従来の式は，中間状態のもつ意味を軽視し，$\omega_{fm_1}, \omega_{fm_2}, \cdots\cdots$ の極からの寄与を無視し，ω_{fi} と 0の極だけを採ったことによって導出される。ここから本当は常に成立するのではないエネルギー保存の要求などが派生する。

§2　前回の計算の要旨

a．ふたつの積分変数をもつとき

以下の章において，次の図のようなグラフだけを考える。

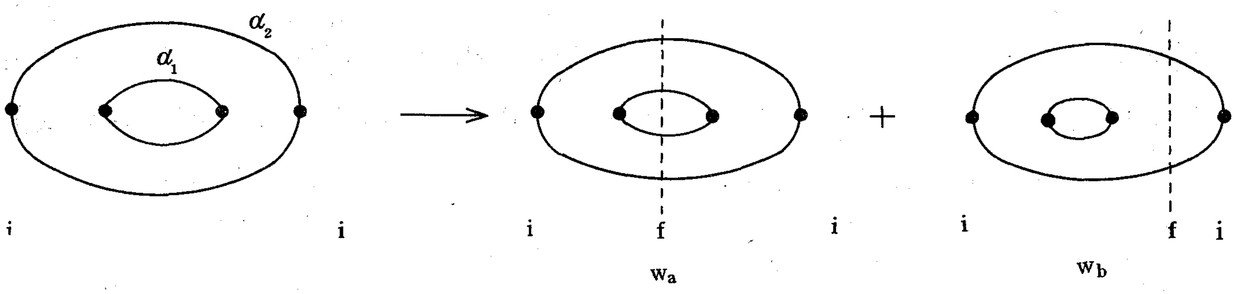


図　1

ここで α_1, α_2 はその状態を指示する振動数である。前回において，α_1，α_2 がともに積分変数であれば図 1のグラフの遷移確率は「零和の規準」から 0であることを示した。

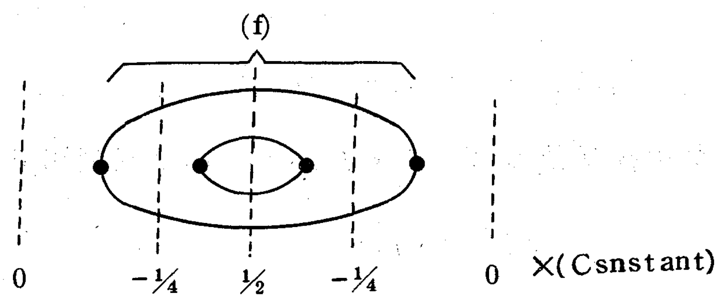


図　2

b ・ひとつが固定された値のばあい

α_2 が固定されたばあいは図 2のようである。

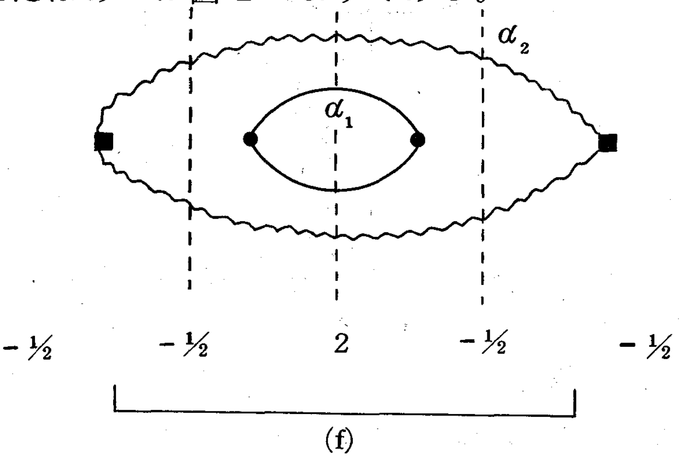


図 3

それぞれの縦線のところに終状態がくる場合の遷移確率の値を $C/\alpha_2{}^2$ を単位として書いてある。Cは定数である。ただしこれは $t\to\infty$ での値で，振動項は落してある。これは $\alpha_2\to 0$ の極限でどうなるのかというのが本論文の主題である。正の無限大に発散するのであろうか？ α_1, α_2 で積分すれば図上の（f） で記した 3つの状態の和が 0であるのは前節のとおりである。

§ 3 $\alpha_2 \to 0$ の場合

豊沢氏[1]のハミルトニアンを少し簡略化して次のようにし，この例について論ずる。

$$H_0 = \varepsilon_0 c_0{}^+ c_0 + \sum_k \varepsilon(k) a_k{}^+ a_k + \sum_\omega \hbar\omega\, b_\omega^+ b_\omega + \sum_q \hbar\omega(q) d_q^+\, d_q$$

$$H' = -\lambda \sum_\omega (c_0^+ a_0 + a_0{}^+ c_0)(b_\omega + b_\omega^+) \frac{1}{\sqrt{\omega}}$$

$$- \mu \sum_{q\,.\,k} (a_{k+q}^+ a_k d_q + a_k^+ a_{k+q} d_q{}^+) \qquad (4)$$

$$[b_\omega, b_{\omega'}^+]_- = \delta_{\omega\omega'} \quad , \quad [d_q , d_{q'}^+] = \delta_{qq'}$$

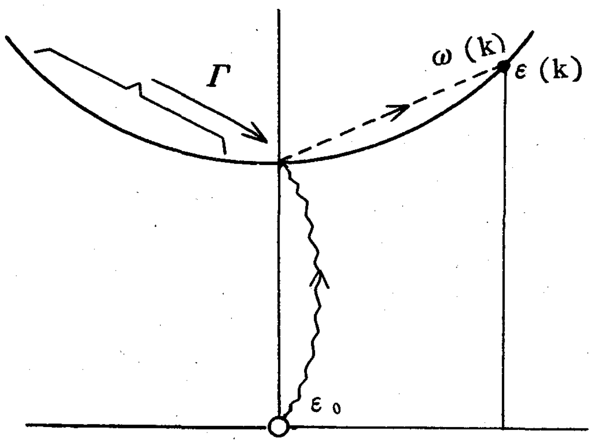


図　4

ここで，ε_0 は基底状態のエネルギー，a_k，a_k^+ は電子のオペレーター，b_ω，b_ω^+ 及び dq，dq^+ はそれぞれフォトン及びフォノンのオペレーターである。周波数 ω のフォトンの吸収係数 $W(\omega)$ は豊沢氏に従うと図 4 の 2次の過程で終状態において波数 k の電子が励起されている確率に等しいので，式（2）の w_a から

$$\omega W^{(4)}(\omega)=\frac{2\pi\lambda^2\mu^2}{\hbar}\quad\frac{f_c f_{a0}^+}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2}\quad\sum_k n_d(k)f_k^+$$
$$\times\delta(\varepsilon(k)-\hbar\omega(k)-\hbar\omega)$$

$$\cong\frac{2\pi\lambda^2\mu^2}{\hbar}\quad\frac{\rho(k_\omega)n_d(k_\omega)}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2}$$

$$f_c=\langle c_0^+c_0\rangle\cong 1,\quad f_{a0}^+=\langle a_0,\ a_0^+\rangle\cong 1,\quad f_k\cong 1$$

$$\rho(k_\omega)=\rho^0(k_\omega)(1-\hbar((d\omega(k)/dk)/(d\varepsilon(k)/dk))_{k\omega})^{-1}$$

$$nd(k\omega)=\langle d_{k\omega}^+\ d_{k\omega}\rangle\qquad(5)$$

ここで k_ω は次の式で決定される。

$$\frac{1}{\hbar}\varepsilon(k_\omega)-\omega(k_\omega)-\omega=0\qquad(6)$$

（5)式は $\hbar\omega\rightarrow\varepsilon(0)$ で発散する。そこで豊沢氏は中間状態（$\varepsilon=\varepsilon(0)$）はフォノンとの相互作用によりレベルブロードニング Γ を持ち，これが式(5)

の分母に付加挿入されるべきだとされた。

$$\Gamma/\hbar = \frac{2\pi}{\hbar}\mu^2 \sum_k n_d(k) f_k^{+} \delta(\varepsilon(k)-\hbar\omega(k)-\varepsilon(0))$$

$$\cong \frac{2\pi}{\hbar} \mu^2 n_d(k_0)\rho(k_0)$$

$$\omega\widetilde{W}^{(4)}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar}\lambda^2\mu^2\rho(k_\omega)n_d(k_\omega)\frac{1}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2+(\Gamma/2)^2} \tag{7}$$

k_0 は(6)式の ω を $\varepsilon(0)/\hbar$ でおきかえた式できめられる。この式の妥当性は他の方法で示された。この $(\Gamma/2)^2$ の挿入は何を意味するのか？ 摂動論的にはその次数を上げたことになるのかそれとも下げたことになるのか？ $\omega=\varepsilon(0)/\hbar$ のときこれは μ の大きさに全然よらず，また ω で積分したとき，その値が同じく μ によらないのはどうしてか？ (7)式から多少の近似のもとで

$$\omega\widetilde{W}^{(4)}(\omega) = \frac{\lambda^2}{\hbar}\frac{\Gamma}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2+(\Gamma/2)^2} \tag{8}$$

$$\int_0^\infty \omega\widetilde{W}^{(4)}(\omega)d\omega = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} \tag{9}$$

その答は実は4次摂動にではなく，最低次の2次摂動にある。2次摂動では従来の式に従うとその寄与は0であると考えられるが，本当はそうではない。

(3)の $a_f^{(1)}$ から，ω のフォトンの吸収確率 $W^{\prime(2)}(\omega)$ は，

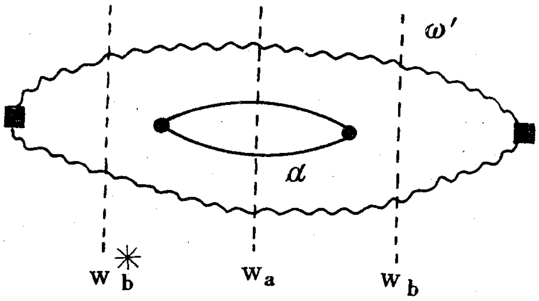
$$\omega W^{\prime(2)}(\omega) \cong \frac{\lambda^2}{t}\frac{4\sin^2\frac{1}{2}(\omega-\frac{\varepsilon(0)}{\hbar})t}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2} \tag{10}$$

で与えられるが，従来の摂動論はこの t を無限大に長いものと信じこんでいるので $\omega\neq\frac{\varepsilon(0)}{\hbar}$ では0であるとみなされる。(10)を積分すると，

$$\int_0^\infty \omega W^{\prime(2)}(\omega)\, d\omega = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \tag{11}$$

これは(9)に等しい。これは何を意味するか？

次に私の方法で4次の遷移確率の表現をもとめる。



$$\omega' = \omega - \frac{\varepsilon(0)}{\hbar}$$

図　4

豊沢氏の吸収係数への寄与の数え方は図4の w_a だけをとっていて，実際は w_b，w_b^{*} からの寄与もあるので不十分である ω' が大きいときは図3から $(-½)+2+(-½)=1$ で従来の方法と一致する。

$$\omega \widetilde{W}'(\omega) = \frac{-\lambda^2\mu^2}{t(2\pi\hbar)^2} f_c f_{a0}^{+} \rho(k_\omega) n_d(k_\omega) f_{k_\omega}^{+}$$

$$\times \Big[\int_c \frac{e^{pt}\ e^{p't}\ dp\ dp'\, d\alpha}{p(p-i\alpha)(p-i(\alpha+\omega'))p'(p'+i\alpha)(p'+i(\alpha+\omega'))}$$

$$+ 2R_e \int_c \frac{e^{pt} e^{p't}\ dp\, dp'\, d\alpha}{p(p+i\alpha)p(p-i\omega')p'(p'+i\omega')} \Big]$$

$$\cong \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2\mu^2 \rho(k_\omega) n_d(k_\omega) \frac{1}{(\hbar\omega')^2} \left(1 - \frac{2\sin\omega' t}{\omega' t} + \cos\omega' t\right) \tag{12}$$

この式は $\omega' \to 0$ のとき，正に発散するのではなくむしろ負に発散し，$(-t^2)$ に比例して増加する。従来の式は(12)の振動項の存在を看過するようにしむける。けれどもそれは誤りである。

摂動論にでてくる時間 t は実際無限大のものではなく $\hbar/\Gamma$ のオーダーである。そして，

$$\int_0^\infty \omega \widetilde{W}^{(4)}(\omega)\ d\omega = 0 \tag{13}$$

であることは§2.a で示したとおりである。(10)(11)(12)(13)式と

$(\Gamma/2)^2$ を 4次の発散項に挿入した(8)式はむしろ 4次からではなく 2次からくることがわかる。実際(10) 式で t を$\hbar/\Gamma$ のオーダーの量とみれば(10)式は

$$\omega W(\omega)^{(2)} \cong \frac{\lambda^2}{\hbar} \frac{\Gamma}{(\hbar\omega-\varepsilon(0))^2+(\Gamma/2)^2} \tag{14}$$

これは(8)式に等しい。

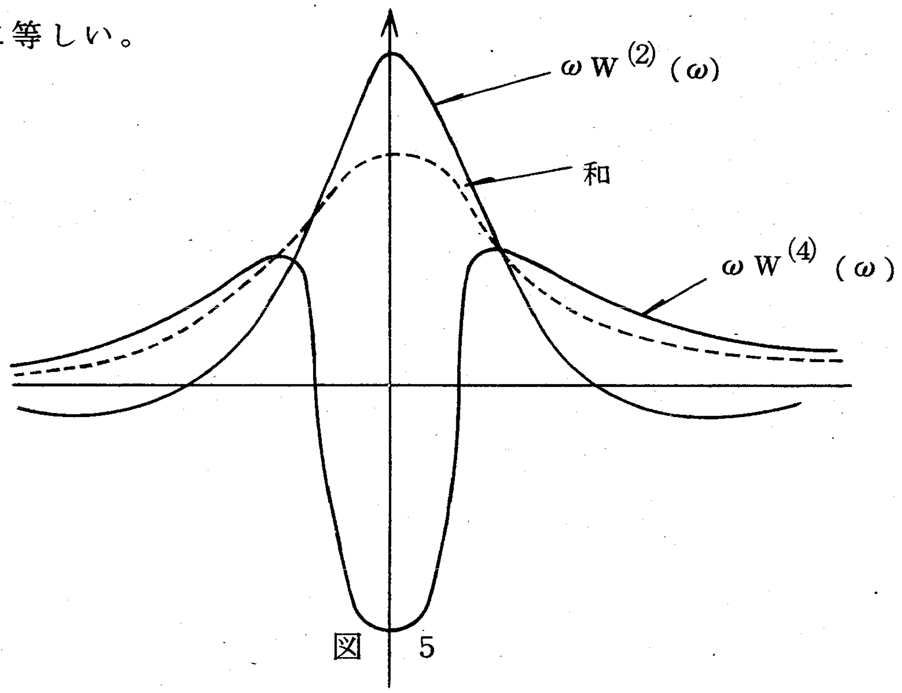


図 5

こうして従来の式の 4次摂動の $\omega'=0$での発散は正にではなく，負にへであり，これはむしろ発散するのではない。さらに$\omega'=0$の付近にエネルギーのゆらぎΓを入れることは，2次摂動からの寄与を斟酌していることに他ならない。そしてこうしてえられた式(8)を積分することは，2次摂動の寄与を積分していることに他ならず，その結果が一致するのは当然である。[2)]

§ 4　おわりに

前回と今回とあわせて，時間を含む摂動論に関する従来の考え方のあやまりを考察しそれを正しいものへと導いた。

Schiff[(3)]は前回の(6)式においてE_{m_i}を$E_{m_i}+i\delta$のように変えれば中間状態からの影響は考慮に入れられると述べているが，それは誤りである。そのようにしても例えば図 1のようなグラフに対し，遷移確率は $1/\delta$ の項をもつこと

になり発散は避けられない。また彼は摂動計算は高次になれば一般に不適切な値を与えるもので，最低次のものが信頼できるものだ，と書いているが，それは違う。彼は，私が前回及び今回に述べたような高次摂動の表見的な矛盾や困難をおそらく克服できなかったのであろう。私は時間を含む摂動論に関して，このように，不明の点は何ひとつないと思うけれども，読者の皆様で，摂動計算上の困難に遭遇していらっしゃる人は私に御相談いただくようお願いします。

Ref

1) Y.Toyozawa J.Phys. Chem. Solids 25 55 (1964)
2) J.Kondo , Y.Zohta Prog. Theor, Phys. 34 325 (1965)
3) L.I.Schiff, Quantum Mechanics
井上健訳
Ⅷ・29.8 − 29.9
p.234 − 237